

PAT-NO: JP401161578A  
DOCUMENT-IDENTIFIER: JP 01161578 A  
TITLE: SUPPORTING SYSTEM FOR MOLECULE DESIGN  
PUBN-DATE: June 26, 1989

INVENTOR-INFORMATION:

NAME

SAKAI, MARIKO

TSUNEKAWA, TAKASHI

ASSIGNEE-INFORMATION:

NAME

TOSHIBA CORP

COUNTRY

N/A

APPL-NO: JP62320413

APPL-DATE: December 18, 1987

INT-CL (IPC): G06F015/60

ABSTRACT:

PURPOSE: To easily select a substituent used as a substitute for a partial structure by deciding the name of a base section except the partial structure which is substituted in a chemical structure formula and displaying the characteristic of the base section through data base retrieval.

CONSTITUTION: When a designer inputs a desired characteristic, a chemical material data base is retrieved and chemical structure formulas and characteristics are displayed. When the designer designates a partial structure to be substituted, a chemical structure formula (structure 2) is displayed and a compound name and retrieval code are produced based on the structure 2 and, when the same compound is found as a result of the data base

**Best Available Copy**

retrieval, its characteristic is displayed. When the designer inputs a corresponding condition, a substituent data base is retrieved and the list of candidate substituents is displayed. When one of the candidates is selected, a substituted chemical structure formula (structure 3) is displayed and, when the same formula is found in the data base, the characteristic or estimated characteristic is displayed in comparison with the structure 1. Moreover, the list of compound means, etc., are displayed.

COPYRIGHT: (C)1989,JPO&Japio

## ⑫ 公開特許公報(A)

平1-161578

⑬ Int.Cl.<sup>4</sup>

G 06 F 15/60

識別記号

450

庁内整理番号

6615-5B

⑭ 公開 平成1年(1989)6月26日

審査請求 未請求 発明の数 1 (全5頁)

⑮ 発明の名称 分子設計支援システム

⑯ 特 願 昭62-320413

⑰ 出 願 昭62(1987)12月18日

⑱ 発 明 者 酒 井 真 理 子 神奈川県川崎市幸区小向東芝町1番地 株式会社東芝総合  
研究所内⑲ 発 明 者 恒 川 尚 神奈川県川崎市幸区小向東芝町1番地 株式会社東芝総合  
研究所内

⑳ 出 願 人 株 式 会 社 東 芝 神奈川県川崎市幸区堀川町72番地

㉑ 代 理 人 弁 理 士 鈴 江 武 彦 外2名

## 明 細 書

## 1. 発明の名称

分子設計支援システム

## 2. 特許請求の範囲

(1) 指定された第1の化学構造式を表示する手段と、表示された第1の化学構造式中で置換される部分構造が領域指定され、該部分構造が適当に補充されることにより得られる第2の化学構造式を表示して名称を決定する手段と、該第2の化学構造式の持つ特性を化学材料データベースから検索して表示するか、又は該第2の化学構造式から計算により予測される特性を表示する手段と、与えられた所定の基準を満たし、上記部分構造の代りに置換される候補となる単一又は複数の置換基及びその特性を置換基データベースから検索して表示する手段と、該置換基を上記部分構造の代りに置換することにより得られる第3の化学構造式を表示して名称を決定する手段と、該第3の化学構造式の持つ特性を化学材料データベースから検索して表示するか、又は第3の化学構造式から

計算により予測される特性を表示する手段とを具備したことを特徴とする分子設計支援システム。

(2) 置換の候補となる複数の置換基がある場合、第2の化学構造式に置換基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度に応じて、置換基による置換を行うか否かを指示する手段を有することを特徴とする特許請求の範囲第1項記載の分子設計支援システム

(3) 置換の候補となる複数の置換基がある場合、順次置換を行い、得られる複数の第3の化学構造式の名称及び特性のリストを作成する手段を有することを特徴とする特許請求の範囲第1項記載の分子設計支援システム。

## 3. 発明の詳細な説明

## 〔発明の目的〕

## 〔産業上の利用分野〕

本発明は計算機を利用して材料の分子設計を支援するシステムに関する。

## 〔従来の技術〕

材料の分子設計を行う場合、通常は、既知の

物質を取上げ、その化学構造式中のある部分構造に着目し、その部分を他の部分構造で置換することにより目的の特性を得ようとする。

このような分子設計のために、計算機を利用した支援システムが開発されている。従来の支援システムを用いた分子設計は以下のようにして行なわれている。まず、分子構造を変更しようとする既知の化合物の化学構造式を表示し、設計者がその化学構造式中に着目した部分構造を指定した後、置換の候補となる置換基が満たすべき所定の特性を指定すると、支援システムは置換基データベースから検索して、候補の条件を満たす置換基の化学構造式及びその特性を表示する。設計者はこの表示をみて置換を行うか否かを決定する。設計者が置換を指示すると、支援システムは指定した部分構造の代りに選択した置換基を置換した後の化学構造式を表示し、その物質名を決定し、化学材料データベースから検索してその特性を表示する。このようにして設計者は支援システムを利用して試行錯誤的に目的の物質を設計することができる。

た第1の化学構造式を表示する手段と、表示された第1の化学構造式中で置換される部分構造が領域指定され、該部分構造が適当に補完されることにより得られる第2の化学構造式を表示して名称を決定する手段と、該第2の化学構造式の持つ特性を化学材料データベースから検索して表示するか、又は該第2の化学構造式から計算により予測される特性を表示する手段と、与えられた所定の基準を満たし、上記部分構造の代りに置換される候補となる単一又は複数の置換基及びその特性を置換基データベースから検索して表示する手段と、該置換基を上記部分構造の代りに置換することにより得られる第3の化学構造式を表示して名称を決定する手段と、該第3の化学構造式の持つ特性を化学材料データベースから検索して表示するか、又は第3の化学構造式から計算により予測される特性を表示する手段とを具備したことを特徴とするものである。

本発明においては、置換の候補となる複数の置換基がある場合、例えば第2の化学構造式に置換

(発明が解決しようとする問題点)

しかし、従来の分子設計支援システムには以下のような問題がある。すなわち、設計者は元の化学構造式中に着目した部分構造の代りに置換する置換基の特性については知ることができるが、どの置換基を選択するかについての判断基準は、実際に置換後の化学構造式が全体としてどのような特性となるかという設計者の予測に頼っているところが、置換後の化学構造式についてのデータベースの検索結果が表示されるまでは、上述した予測の正否を全く判定することができない。このため、置換基の選択に要する試行錯誤の回数が多くなり、無駄な労力を必要としていた。

本発明は上記問題点を解決するためになされたものであり、元の化学構造式中の部分構造の代りに置換する置換基の選択に要する労力が少ない分子設計支援システムを提供することを目的とする

【発明の構成】

(問題点を解決するための手段)

本発明の分子設計支援システムは、指定され

基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度に応じて、置換基による置換を行うか否かを指示する手段を設けてもよい。また、置換の候補となる複数の置換基がある場合、順次置換を行い、得られる複数の第3の化学構造式の名称及び特性のリストを作成する手段を設けてもよい。

(作用)

このような分子設計支援システムによれば、第1の化学構造式中で置換される部分構造を除いた基幹部(第2の化学構造式)についてその名称を決定し、データベース検索により基幹部の持つ特性を表示するようにしているので、基幹部にどのような特性を与えればよいかがわかりやすくなる。この結果、置換基の選択基準が明確となり、置換基選択のための試行錯誤の回数も減少する。また、置換基の選択基準として、第2の化学構造式に置換基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度という条件を与えておけば、複数の候補置換基の中から少


設の候補置換基に絞ることができ、置換基選択のための労力をより低減することができる。

#### (実施例)

以下、本発明の実施例を第1図に示すフローチャート及び第2図に示す化学構造式の表示例を参照して説明する。

第1図に示すように、設計者が所望の特性を入力する(ステップ1)と、システムはその条件に応じて化学材料データベースから検索し(ステップ2)、与えられた条件に適合する単一又は複数の化学構造式及びその特性を表示する(ステップ3)。この場合、上述したように希望条件に応じて化学材料データベースから検索する方式により、適合する化合物がない場合には、予め規定した順に制限をゆるめながら、条件に近い化合物を検索する。複数の化学構造式が表示された場合、設計者はそのうちから分子構造を変更して分子設計を行う候補となる化合物(構造1)を選択する(ステップ4)。この結果、例えば第2図(a)に示すような化学構造式が表示される。

この場合、生体高分子やエンジニアリングポリマーなど、特定の構成単位構造が連続するようなもので、その単位を置換される単位と考えるような場合には、化学構造式ではなく記号の列を用いる。なお、例えば候補化合物が最初から決まっている場合には、その化学構造式については設計者が入力し、その特性についての化学材料データベースから検索して表示させてもよい。

設計者が表示された化学構造式中で置換される部分構造を第2図(b)に示すように指定し、指定領域への適当な補完を指定する(ステップ4)と、第2図(c)に示すように分子構造として意味のある化学構造式(構造2)が表示される(ステップ5)。なお、第2図(b)から(c)を表示させる場合には原子を補完せず、直接的に結合することを指定している。また、例えば構造1がのような構造であり、水素1原子を指定領域にしたような場合、構造2としては構造1と同じものが表示される場合もある。

システムは構造2に基づき、化合物名と検索コ

ードを生成させ(ステップ6)、化学材料データベースから検索し(ステップ7)、同じものがあったかどうかを判断する(ステップ8)。そして、同じものがあった場合にはその特性を表示する(ステップ10)。一方、同じものがなかった場合には構造2に基づき計算により特性を予測して(ステップ9)、その特性を表示する(ステップ10)。

設計者が構造2にどのような特性を与えれば目的とする分子設計が行なえるかについて考察し、その特性に対応する条件を入力する(ステップ11)と、システムは置換基データベースから検索して(ステップ12)、上記条件に適合し置換の候補となる置換基(例えば第2図(d)~(f))のリストを作成して表示する(ステップ13)。

システムは候補となる置換基のうちの1つを選択し(ステップ14)、例えば第2の化学構造式に置換基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度に応じて、置換基による置換を行うか否かを指示するような条

件のもとで、候補となる置換基を置換するかどうかを判断する(ステップ15)。そして、置換する場合(例えば第2図(e)図示の置換基で置換する場合)には、第2図(g)に示すように置換された化学構造式(構造3)を表示する(ステップ16)。一方、置換しない場合には次の候補置換基について置換するかどうかを判断する。システムは、構造3に基づき、化合物名と検索コードを生成し(ステップ17)、化学材料データベースから検索し(ステップ18)、同じものがあったかどうかの判断(ステップ19)、及び参照する特性についてのデータがあるかどうかの判断(ステップ20)を行なう。そして、同じものがあり、参照する特性についてデータがある場合にはその特性を表示する(ステップ22)。一方、同じものがなかった場合又は参照する特性についてデータがない場合には構造3に基づき計算により特性を予測して(ステップ21)、その特性を表示する(ステップ22)。この構造3の特性は、構造1の特性と比較できるような状態で表示される。更に、システム

は次の候補置換基があるかどうかを判断し（ステップ23）、ある場合には上記と同様の操作を繰返し、ない場合には構造1と全ての構造3についての、化合物名、構造式、特性のリストを作成して表示する（ステップ24）。

このような分子設計支援システムによれば、ステップ10において第1の化学構造式中で置換される部分構造を除いた第2の化学構造式の特性を表示するようにしているので、第2の構造式を有する化合物にどのような特性を与えればよいかがわかりやすくなる。この結果、置換基の選択基準が明確となり、置換基選択のための試行錯誤の回数も減少する。また、上記実施例のように、ステップ15で第2の化学構造式に置換基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度という条件のもとで置換基を選択させるようにしておけば、多数の候補置換基の中から少数の候補置換基に絞ることができ、置換基選択のための労力をより低減することができる。

なお、上記実施例では、ステップ15で第2の化

学構造式に置換基を置換することにより得ようとする目的の特性と置換基の持つ特性との類似度という条件のもとで置換基を選択させているが、ステップ15を省略し、全ての候補置換基について置換を行い、その後置換の第3の化学構造式について名称と特性のリストを作成するようにしてもよい。

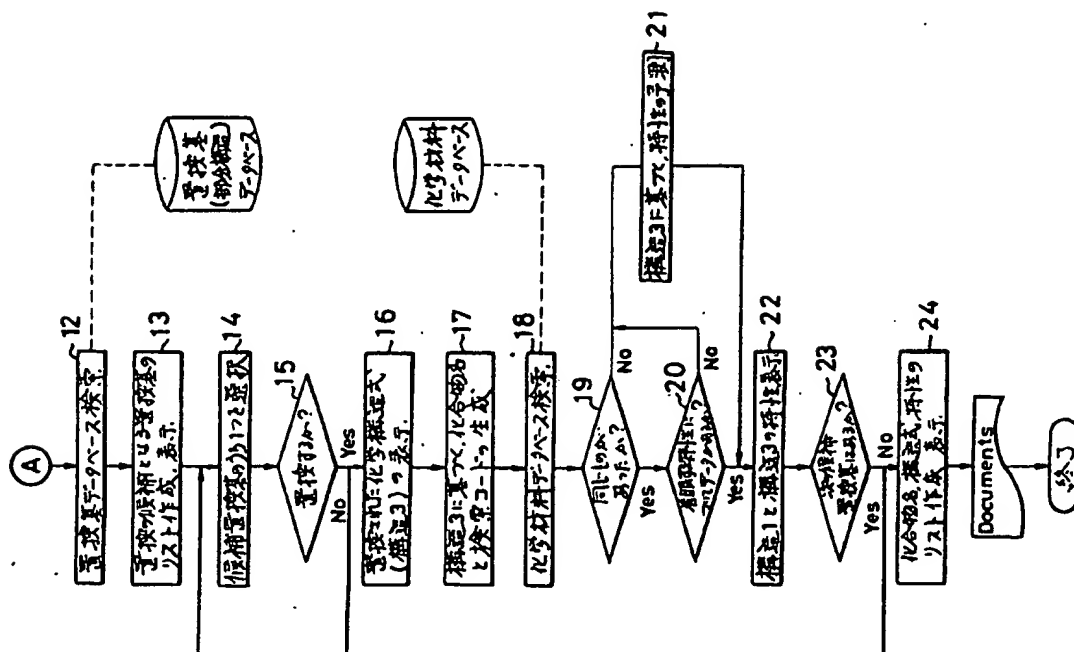
#### 【発明の効果】

以上詳述したように本発明の分子設計支援システムによれば、元の化学構造式中の部分構造の代りに置換する置換基の選択に要する労力が少なくなるなど顕著な効果を奏するものである。

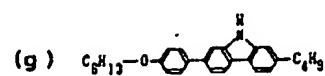
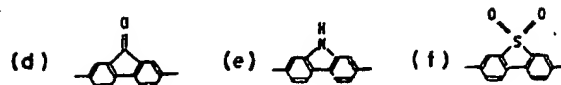
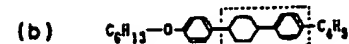
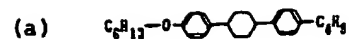
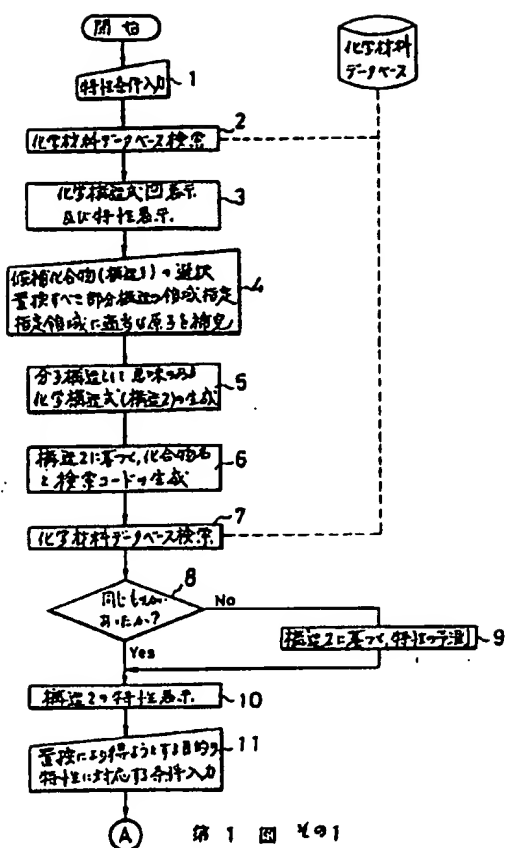
#### 4. 図面の簡単な説明

第1図は本発明の実施例における分子設計支援システムのフローチャート図、第2図(a)～(g)は同分子設計支援システムにおける化学構造式の表示例を示す図である。

出願人代理人 弁理士 鈴江武彦



第1図の2



第2図